Теория и приложения дискретно-стохастических численных методов: новые результаты

Войтишек А. В.
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск; vav@osmf.sscc.ru

Введение. С развитием вычислительной техники возрастает интерес к численным методам решения прикладных задач, в частности к статистическому моделированию (или методу Монте-Карло; см., например, [1]). Традиционно методы Монте-Карло рассматриваются в качестве альтернативных «детерминированным» численным методам (в частности, конечно-разностным и конечно-элементным схемам). Однако во многих случаях эффективными оказываются смешанные алгоритмы, содержащие в себе элементы детерминированных и стохастических численных схем. Такие комбинированные алгоритмы можно назвать *дискретно-стохастическими численными методами* (см. разд. 5.3 в работе [1]).

Следует сразу отметить, что спектр дискретно-стохастических алгоритмов достаточно широк. Комбинированные численные методы возникают во всех основных разделах теории численного статистического моделирования, к которым следует отнести: численную реализацию выборочных значений и траекторий случайных величин, векторов и функций; вычисление многократных интегралов; функциональные оценки метода Монте-Карло; приложения, связанные с решением задач вычислительной математики и математической физики [1]. Заметим, что под термин «дискретно-стохастические численные методы» подходят также алгоритмы численного решения стохастических дифференциальных уравнений, динамико-вероятностные модели окружающей среды, вероятностные клеточные автоматы, рандомизированные сеточные алгоритмы и многое другое.

В данной работе сделан обзор результатов исследований дискретно-стохастических методов, проводимых в последнее время в отделе статистического моделирования в физике Института вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск).

1. «Моделируемые» базисы и вероятностные распределения. В настоящее время широкое применение находят алгоритмы и пакеты программ, в которых реализуются множества точек, распределенных в сложных областях согласно заданной плотности распределения. К таким задачам относятся, в частности, проблемы визуализации объектов на ЭВМ, построения адаптивных сеток и др. В работах [2, 3] представлен программный модуль *AITricks GeomRandom*, в котором использован ряд принципиальных соображений по оптимизации соответствующих алгоритмов численного моделирования. В частности, существенным является то обстоятельство, что при применении кусочно-полиномиальных аппроксимаций функции плотности $g(\mathbf{x})$ вида

$$f(\mathbf{x}) = HL_M g(\mathbf{x}); \quad L_M g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{M} w_i(\mathbf{g})\chi_i(\mathbf{x}); \quad H = \frac{1}{\int L_M g(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}} \tag{1}$$

(здесь $\{w_i(\mathbf{g})\}$ – коэффициенты, связанные со значениями $\mathbf{g} = \big(g(\mathbf{x}_1), \ldots, g(\mathbf{x}_M)\big)$ в узлах сетки $\{\mathbf{x}_i\}$, а $\{\chi_i(\mathbf{x})\}$ – базисные функции) для больших M возможна реализация эффективных модификаций соответствующего метода суперпозиции (квантильного метода, метода Уолкера и др. – см., например, [1]). Кроме того, существенным здесь является подбор соответствующего аппроксимационного базиса, который кроме обычных свойств аппроксимации и устойчивости должен обладать свойством *«моделируемости»*. Последнее означает, что функции $\{\chi_i(\mathbf{x})\}$ из соотношения (1) должны быть пропорциональны вероятностным плотностям, для которых существуют эффективные алгоритмы численной реализации выборочных значений. В работе [4] показано, что хорошими свойствами моделируемости обладает многомерный конечно-элементный базис Стренга–Фикса (терминология из книги [5]). Интересной видится возможность (пока не изученная) использования в приближениях вида (1) вейвлетовых методов.

Во многих ситуациях для более «быстрого» получения выборочных значений случайно распределенных точек вместо приближения плотности целесообразно выбирать *моделируемые вероятностные распределения*, допускающие построение эффективных алгоритмов численного моделирования (эта возможность также предусмотрена в программном модуле *AITricks GeomRandom* [3]). В работе [2] представлены соответствующие соображения по «искусственному» конструированию вероятностных распределений, допускающих эффективное моделирование методами: обратной функции распределения, моделирования двумерного случайного вектора с зависимыми компонентами, интегральной и дискретной суперпозиции, исключения. Это является, в частности, основой создания «банка» моделируемых вероятностных распределений с целью использования его при построении эффективных алгоритмов численного статистического моделирования. В качестве одного из примеров применения представленных технологий в работе [2] рассмотрен итерационный дискретно-стохастический алгоритм построения адаптивных сеток (см. [6, 7], а также доклад данной конференции [8]).

2. Дискретно-стохастические алгоритмы численного интегрирования. Для приближенного вычисления интегралов малых размерностей с гладкими (в обычном или обобщенном смыслах) подынтегральными функциями и относительно простыми областями интегрирования развита теория *кубатурных формул* (см., например, [9]). К недостаткам «классических» (детерминированных) кубатурных формул на классах подынтегральных функций следует отнести: слабый учет специфики той или иной подынтегральной функции, необходимость разработки специальных численных алгоритмов поиска оптимальных весов и (или) узлов, чувствительность к росту размерности и гладкости начальных данных (подынтегральной функции и области интегрирования), трудности в построении показательных тестовых численных примеров и контроля точности и затрат при практических вычислениях. Для существенно многомерных задач достаточно эффективным оказывается *стандартный метод Монте-Карло* (см., например, [1]). Главным недостатком метода Монте-Карло является относительно низкая скорость сходимости погрешности к нулю при возрастании числа случайных узлов.

В работах [10, 11] показано, что весьма эффективными могут оказаться и смешанные, *комбинированные процедуры численного интегрирования*, сочетающие в себе элементы кубатурных формул и метода Монте-Карло. По-видимому, одна из первых численных схем подобного рода была представлена Н. С. Бахваловым в начале шестидесятых годов прошлого века (см. работу [12], а также доклад [13] данной конференции). Этот алгоритм можно трактовать как предельный случай *выборки по группам*. Кроме этой конструкции в работах [10, 11] рассмотрены *дискретно-*

стохастические версии выборки по важности, выделения главной части, метода интегрирования по части области, метода сложной многомерной симметризации, метода равномерной выборки, метода с поправочным множителем, геометрического метода и др. Все эти приемы позволяют в ряде случаев существенно понизить трудоемкость стандартного алгоритма метода Монте-Карло.

3. Функциональные алгоритмы метода Монте-Карло. В последние два десятилетия активно развивается (в основном в отделе статистического моделирования в физике ИВМиМГ СО РАН) теория приближения функций, заданных в интегральной форме, а также ее приложения. Основным объектом изучения является решение интегрального уравнения Фредгольма второго рода, отражающее распределение состояний важных модельных марковских процессов. Дискретно-стохастический алгоритм приближения решения включает введение сетки по параметру, оценку значений функции в узлах методом Монте-Карло и восполнение решения по полученным значениям в узлах с использованием аппроксимационного базиса. Соответствующий базис должен обладать хорошими свойствами устойчивости (этими свойствами обладают, в частности, базисные функции Стренга–Фикса [1, 4, 5, 14]).

При изучении сходимости дискретно-стохастических численных алгоритмов приближения функций важным является вопрос о выборе функциональной меры и вероятностного смысла сходимости к нулю погрешности метода. Следуя традициям классического численного анализа (см., например, [9]), здесь разумно использовать L_2- и C-метрику для погрешности и сходимость в среднем и по вероятности соответственно (см., например, [1, 14]). Для этих подходов к оценке погрешности удается разложить погрешность на «детерминированную» и «стохастическую» компоненты, первая из которых оценивается сверху с помощью соответствующих аппроксимационных теорем [5], а вторая сводится к оценке максимума случайных погрешностей в узлах сетки.

Далее следует учесть, какие стохастические оценки метода Монте-Карло (независимые, зависимые, слабо зависимые и т.д.) используются в узлах сетки. Для независимых оценок при построении верхней границы для максимума случайных погрешностей в узлах сетки используется теория порядковых статистик. Для оценок по методу зависимых испытаний требуется использование специальной теории слабой (функциональной) сходимости последовательностей случайных функций [1, 14].

Полученные верхние границы погрешности $T(M,n)$ используются затем для определения *условно-оптимальных параметров* – числа M_{opt} узлов используемой сетки и числа n_{opt} реализаций стохастических оценок в узлах. Здесь из уравнения $T(M,n) = \delta$ (здесь δ – требуемый уровень погрешности) один из параметров (например, число узлов M) выражается через другой (через число испытаний n) и подставляется в выражение $S(M,n)$, характеризующее трудоемкость (затраты) функционального алгоритма. Получаемая функция одного переменного исследуется на минимум. Точка минимума дает выражение для соответствующего условно-оптимального параметра (см., например, [1, 14]).

Применение описанной здесь общей схемы построения и исследования функциональных алгоритмов встречает специфические трудности для тех или иных прикладных задач. Для целого ряда важных приложений эти трудности преодолены в работах Е. В. Шкарупа. Ею, в частности, подробно исследованы функциональные алгоритмы для решения уравнения Больцмана [15, 16] и ряда краевых задач математической физики [17, 18].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 09–01–00035, 10–01–00040, 11–01–12030).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Михайлов Г. А., Войтишек А. В.* Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Изд. центр «Академия», 2006.

2. *Бессмельцев М. В., Войтишек А. В.* Модификации геометрических программных модулей, связанные с построением моделируемых вероятностных плотностей // Вычислительные технологии. 2011. Т. 16, № 4.

3. *http://aitricks.com/products/geomrandom/*

4. *Voytishek A. V., Kablukova E. G.* Using the approximation functional bases in Monte Carlo methods // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2003. V. 18, № 6. P. 521–542.

5. *Марчук Г. И., Агошков В. И.* Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981.

6. *Нечаева О. И.* Нейросетевые модели, алгоритмы и комплекс программ для построения адаптивных сеток // Дисс. на соиск. уч. степени канд. физ.-матем. наук. Новосибирск: НГУ, 2007.

7. *Kohonen T.* Self-Organizing Maps. Springer-Verlag, 2001.

8. *Войтишек А. В., Малицкая Н. С., Сидорова Т. В.* Исследование эффекта упорядочения узлов в одномерном дискретно-стохастическом алгоритме построения адаптивных сеток // Данный сборник. С....

9. *Бахвалов Н. С.* Численные методы. М.: Наука, 1975.

10. *Войтишек А. В.* Дискретно-стохастические модификации стандартного метода Монте-Карло. Новосибирск: НГУ, 2009.

11. *Каблукова Е. Г.* Адаптивные дискретно-стохастические алгоритмы численного интегрирования // Дисс. на соиск. уч. степени канд. физ.-матем. наук. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2009.

12. *Бахвалов Н. С.* Об оптимальных оценках скорости сходимости квадратурных процессов и методов интегрирования типа Монте-Карло на классах функций // Численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений и квадратурные формулы. М.: Наука, 1964. С. 5–63.

13. *Войтишек А. В.* Оптимальные дискретно-стохастические кубатурные формулы // Данный сборник. С....

14. *Войтишек А. В.* Функциональные оценки метода Монте-Карло. Новосибирск: НГУ, 2009.

15. *Plotnikov M. Yu., Shkarupa E. V.* Construction of an upper error bound and optimization of the test particle method // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2008. V. 23, № 3. P. 251–264.

16. *Plotnikov M. Yu., Shkarupa E. V.* Some approaches to error analysis and optimization of the DSMC method // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2010. V. 25, 2. P. 147–167.

17. *Шкарупа Е. В.* Оценка погрешности и оптимизация функциональных алгоритмов блуждания по решетке решения задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца // Сибирский математический журнал. 2003. Т. 44, № 5. С. 1163–1182.

18. *Makarov R. N., Shkarupa E. V.* Stochastic algorithms with Hermit cubic spline interpolation for global estimation of solutions of boundary value problems // SIAM Journal of Scientific Computing. 2008. V. 30, № 1. P. 169–188.